

E.T.S. de Ingeniería Industrial,
Informática y de Telecomunicación

ANÁLISIS DEL IMPACTO AMBIENTAL DE LAS NUEVAS RUTAS QUÍMICAS PARA LA PRODUCCIÓN DE ÁCIDO LÁCTICO



Grado en Ingeniería en Diseño Mecánico

Trabajo Fin de Grado

Mikel Munárriz Tabuena

Dirigido por Alberto Navajas León

Pamplona, 26 de febrero de 2021

RESUMEN

El Análisis de Ciclo de Vida (ACV) se ha impuesto, durante las últimas décadas, como una herramienta medioambiental de referencia a la hora de cuantificar los impactos generados durante el ciclo de vida de un producto/proceso. Más específicamente, el ACV consiste en la compilación de entradas y salidas relacionadas con el proceso y su posterior transformación en los indicadores medioambientales recomendados por la UE.

Esta metodología, unida a la búsqueda de una producción energética y de materiales más sostenible, llevada a cabo en las biorrefinerías, son la base del presente documento.

Uno de los compuestos de referencia procedente de las biorrefinerías es el ácido láctico, que tiene unas propiedades físicas y biológicas muy interesantes dentro de la industria textil, alimentaria, y en la fabricación de bioplásticos.

En este contexto, este documento se centra en comparar, mediante ACV, el proceso fermentativo tradicional de obtención de ácido láctico, frente a un proceso químico de reacción catalítica por medio de un catalizador Sn-MCM-41. Éste, se trata de un catalizador derivado de las zeolitas cuya actividad en la reacción anterior ha sido estudiada por diversos grupos de investigación.

Los resultados indican que el proceso bioquímico tradicional, a pesar de las grandes cantidades de yeso producidas, es menos impactante que el proceso catalítico, por lo que abre la puerta al estudio de mejoras de este proceso químico con catalizador Sn-MCM-41.

ABSTRACT

Life Cycle Assessment (LCA) constitutes a reference tool for measuring environmental impacts of a product/process. This methodology (recommended by the EU) consists in the compilation of inputs and outputs related with the life cycle of a given product/process, and its posterior transformation in environmental indicators.

This technique, alongside the low-impact production of energy and materials carried out in the biorefineries, are the key of this document.

One of the main substances produced in the biorefineries is lactic acid, whose physical and biological properties present a lot of interest in fields like the food industry, textile industry, or in the production of bioplastics.

In this context, the main goal of this project is to compare, through an LCA, the traditional fermentative process of lactic acid, with a chemical catalytic process that uses a Sn-MCM-41 catalyst for the obtention of lactic acid. Notice that Sn-MCM-41 is a zeolite-derived catalyst and its activity in the process under study has been studied and documented by several research groups.

The results show that the environmental impacts of the traditional biochemical process are lower than the impacts related with the catalytic process, even considering the large quantities of gypsum produced in the fermentative process. These results open the door for further studies and improvements to the catalytic reaction with Sn-MCM-41.

PALABRAS CLAVE

Análisis de Ciclo de Vida

ACV

Ingeniería medioambiental

GaBi software

Reducción de impactos

Catalizador mesoporoso

Sn-MCM-41

Fermentación

Ecodiseño

Ácido láctico

Metil-lactato

Biorrefinería

Biomasa

Zeolita

ÍNDICE

1. INTRODUCCIÓN.....	1
1.1. Contexto medioambiental y concepto de biorrefinería.....	1
1.2. Moléculas plataforma dentro del campo de las biorrefinerías	2
1.3. El ácido láctico como “molécula plataforma”	5
1.4. Problemática de la producción de ácido láctico.....	8
1.5. Obtención de ácido láctico mediante zeolitas como catalizadores heterogéneos..	9
1.6. Obtención de ácido láctico con Sn-MCM-41 como catalizador.....	10
1.7. Análisis de Ciclo de Vida para la determinación de impactos ambientales	11
2. OBJETIVOS DEL PROYECTO	13
2.1. ACV de obtención de ácido láctico por la ruta bioquímica.....	13
2.2. ACV de la obtención de ácido láctico por la ruta química utilizando el catalizador Sn-MCM-41	13
2.3. Comparación de los resultados.	13
3. ANÁLISIS DE CICLO DE VIDA (ACV)	14
3.1. Definición del objetivo y del alcance	14
3.2. Análisis de Inventario de Ciclo de Vida (ICV).....	15
3.2.1. Análisis de Inventario de la ruta bioquímica.....	16
3.2.2. Análisis de Inventario de la ruta química.....	19
3.3. Evaluación del Impacto de Ciclo de Vida (EICV)	23
3.3.1. Indicadores de nivel I	24
3.3.2. Indicadores de nivel II.....	25
3.3.3. Indicadores de nivel II/III.....	26
3.3.4. Indicadores de nivel III	26
3.4. Interpretación de los resultados	26
3.4.1. Comparación entre ambas rutas	26
3.4.2. Resultados de la ruta bioquímica	28

3.4.3. Resultados de la ruta química.....	30
4. CONCLUSIONES.....	32
5. BIBLIOGRAFÍA.....	34

1. INTRODUCCIÓN

1.1. Contexto medioambiental y concepto de biorrefinería

Desde los inicios de la era moderna, el ser humano y su estilo de vida han estado ligados al uso de combustibles fósiles. Además, durante las últimas décadas, la demanda energética global se ha visto enormemente incrementada debido al rápido aumento de la población, unido a una industrialización extensiva. En este contexto, el modelo energético y productivo dependiente de los combustibles fósiles presenta diversos problemas, siendo uno de los más importantes la incertidumbre sobre el agotamiento de las reservas mundiales. Asimismo, el uso de estos combustibles conlleva una serie de impactos ambientales muy severos, especialmente la emisión de CO₂, asociada al efecto invernadero.

En esta situación, y con el creciente aumento de la conciencia medioambiental, resulta evidente la necesidad de encontrar fuentes de energía y materiales alternativas, que sean renovables, respetuosas con el medioambiente y económicamente viables.¹ Esto ha dado lugar al desarrollo de las biorrefinerías, que son instalaciones destinadas a la producción de combustibles (biocombustibles), calor y electricidad (bioenergía) y biomateriales a partir de biomasa. Esto se ilustra en la Figura 1, en la que se muestra un esquema del concepto de biorrefinería, que refleja el flujo circular de materias primas y energía, con el que se trata de alcanzar un modelo energético y productivo más sostenible.

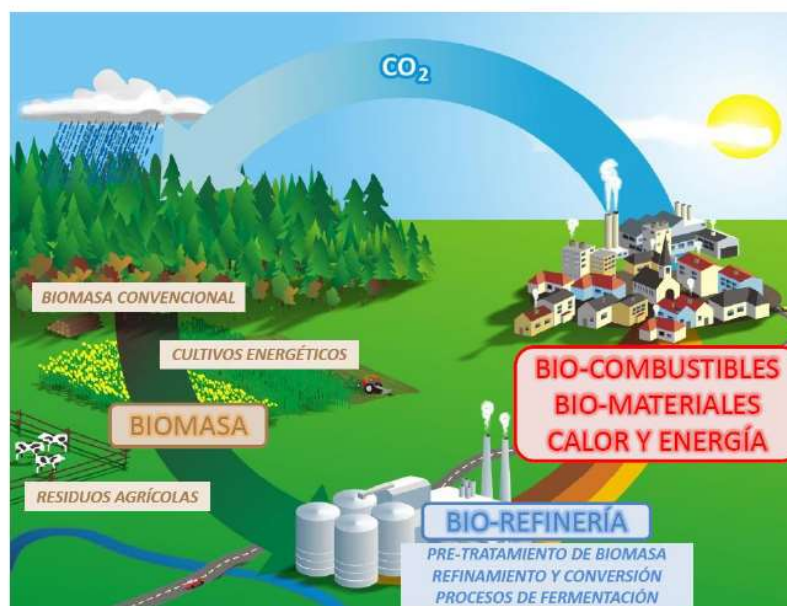


Figura 1. Concepto de biorrefinería. (Imagen obtenida de www.aartvddool.com).

Las biorrefinerías deben estar implementadas siguiendo las directrices de la Química Verde e incluyendo todas aquellas tecnologías destinadas a reducir los impactos medioambientales. Cabe destacar que la Química Verde consiste en una serie de principios para la fabricación de productos químicos de forma sostenible, que trata de evitar la generación, manipulación y el uso de sustancias químicas peligrosas. Para ello, la metodología a utilizar debe minimizar el uso energético y aumentar la seguridad de los procesos, respetando la integridad del planeta y de los trabajadores de la industria. Como resultado, los productos finales deben degradarse en sustancias inocuas, con una toxicidad nula y empleando el mínimo gasto de recursos.²

La Química Verde consta de 12 principios básicos, que se muestran de forma esquemática en la Figura 2. Entre ellos, podemos encontrar la catálisis y la minimización del uso energético, que tanta importancia poseen en el presente trabajo.

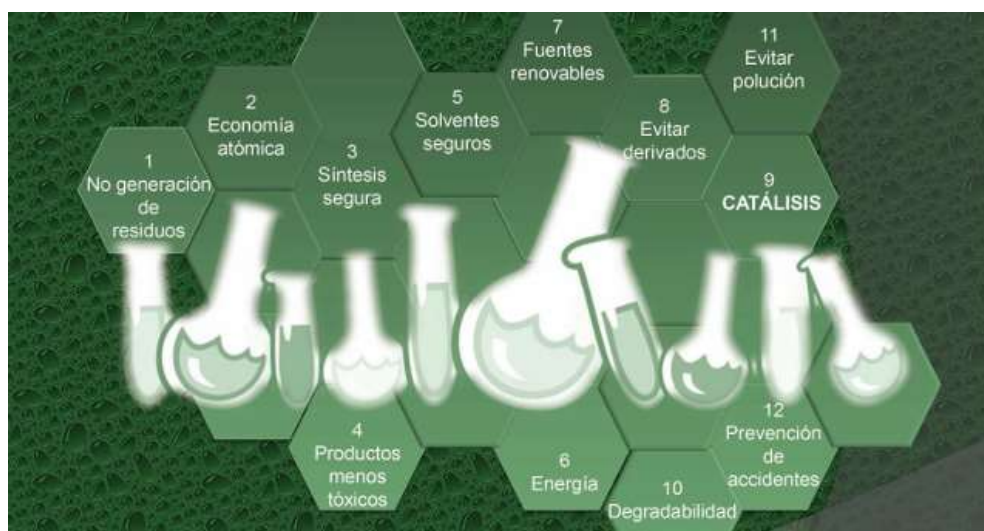


Figura 2. Química Verde. (Imagen obtenida de www.blog.analitek.com).

1.2. Moléculas plataforma dentro del campo de las biorrefinerías

Las moléculas plataforma (en inglés, “*platform molecule*”) son aquellas moléculas que pueden utilizarse como bloque de construcción (en inglés, “*building block*”) para obtener otros productos químicos y materiales de mayor valor añadido.

Este tipo de moléculas están muy extendidas en las biorrefinerías, ya que mediante su uso se posibilita la unificación de procesos primarios, disminuyendo las instalaciones necesarias para obtener los productos finales. La obtención de moléculas plataforma en biorrefinerías va en aumento, como es el caso del etanol, que se produce mayoritariamente a partir de la fermentación de azúcares, quedando el proceso de transformación química del etileno (recurso petroquímico) casi en desuso.

Respecto a la obtención de este tipo de moléculas mediante biomasa, como materia prima inicial se pueden utilizar las grandes reservas de carbohidratos presentes en la naturaleza, dado que la mayor parte de la biomasa producida está formada por celulosa y hemicelulosa (polímeros formados por monosacáridos de 5 o 6 átomos de carbono).

Tal es la importancia que poseen las moléculas plataforma dentro de la industria química que se producen 60791 kilotoneladas anualmente (40% de la producción total) en la Unión Europea (ver Tabla 1). Sin embargo, solo 181 kilotoneladas proceden de las biorrefinerías (4% del total de moléculas plataforma), lo que pone de manifiesto la necesidad de fomentar la producción en estos complejos.

Tabla 1. Estimación de la producción de las biorrefinerías en la Unión Europea en el año 2019.³

Categoría	Producción en biorrefinerías EU (kt/a)	Producción total EU (kt/a)	Porcentaje de producción en biorrefinerías EU (%)	Consumo ecológico EU (kt/a)
Moléculas plataforma	181	60791	0,3	197
Disolventes	75	5000	1,5	107
Polímeros para plásticos	268	60000	0,4	247
Pinturas, recubrimientos, tintas y colorantes	1002	10340	12,5	1293
Surfactantes	1500	3000	50,0	1800
Cosméticos	558	1263	44,0	558
Adhesivos	237	2680	9,0	320
Lubricantes	237	6764	3,5	220
Plastificantes	67	1300	9,0	117
Fibras	600	4500	13,0	630
Total	4725	155638	3,0	5489

También cabe destacar la gran cantidad de toneladas (60000 kt) destinadas a la fabricación de polímeros, de las cuales solo 268 son producidas en biorrefinerías. Una explicación para ello podría ser la menor rentabilidad asociada a la fabricación ecológica o la diferencia cualitativa entre los productos poliméricos convencionales y los ecológicos, que al ser más novedosos aún no poseen unas propiedades mecánicas y químicas tan desarrolladas.

Como se ha comentado, la producción de las principales moléculas plataforma de la industria de las biorrefinerías se puede llevar a cabo utilizando las reservas de biomasa celulósica y hemicelulósica. Sin embargo, se distinguen dos vías principales muy diferenciadas para la elaboración de estos compuestos:

- Fermentación: gran cantidad de compuestos muy establecidos en el mercado son fabricados mediante este proceso. Entre ellos se encuentran muchos alcoholes, aminoácidos, ácidos orgánicos, polímeros, vitaminas, antibióticos y enzimas industriales. En 2013, se fabricaron 110 millones de toneladas de productos fermentativos con un valor en el mercado de 207 billones de dólares. Principalmente, este volumen de negocio se asocia al etanol, utilizado como combustible para el transporte.⁴
- Transformación química: los compuestos orgánicos de 5 o 6 átomos de carbono son aptos para distintas reacciones como la deshidratación, la hidrogenación, la reducción o la oxidación. Muchos de los compuestos producidos mediante la transformación química de glucosa son muy prometedores como posibles combustibles alternativos o precursores en la síntesis de polímeros. En la Figura 3 se muestran las principales moléculas plataforma obtenidas mediante estas técnicas.

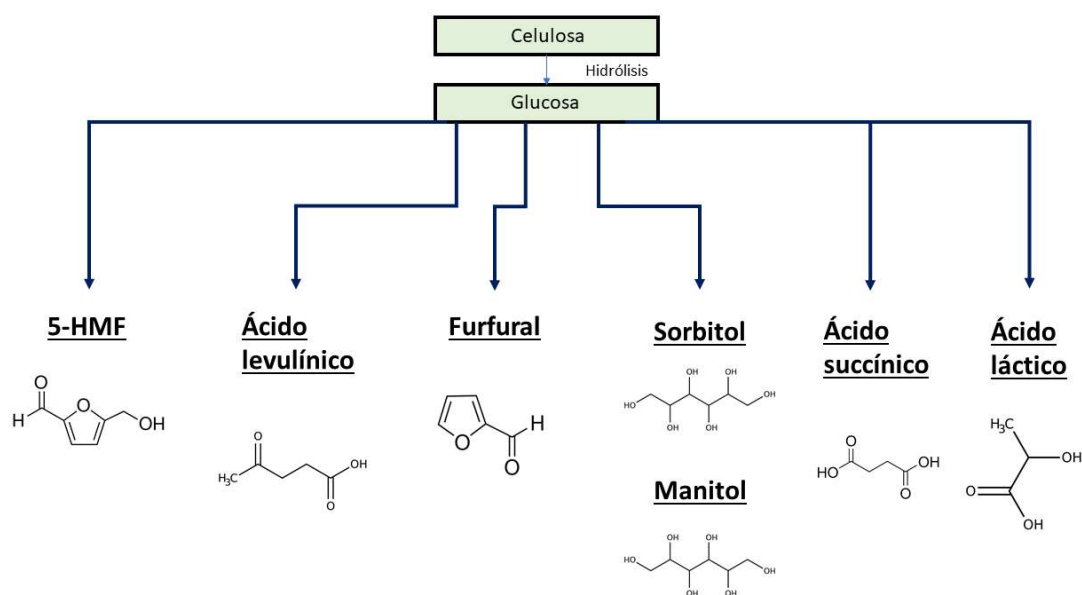


Figura 3. Principales moléculas plataforma obtenidas a partir de la transformación química de la glucosa.

En primer lugar, el hidroximetilfurfural (5-HMF) es uno de los referentes de la industria de las biorrefinerías, cuyos derivados (ácido levulínico, 2,5-bis(hidroximetil)furano (2,5-BHF), 2,5-dimetilfurano (2,5-DMF) y 2,5-diformilfurano (2,5-DFF)) son buenos precursores para la síntesis de materiales poliméricos como poliésteres, poliamidas o poliuretano.

El ácido levulínico también destaca como molécula plataforma dado que es apto para distintas reacciones como oxidación, reducción, esterificación, sustitución y condensación. Sus derivados están presentes en la preparación de lubricantes, resinas, materiales biológicamente activos, adsorbentes, baterías o componentes electrónicos.

El furfural es un producto clave en la refinación de lubricantes a partir de petróleo, donde se emplea como conglomerante de arena de fundición, y es la base para la producción de otros químicos como el furano, el furfural alcohol y el tetrahydrofurano (THF).

Uno de los compuestos derivados del ácido succínico es el 1,4-butanodiol (BDO), que puede ser empleado como disolvente verde en la síntesis de materiales poliméricos. También se puede obtener a partir del ácido succínico γ -butirolactona (GBL), N-metil-2-pirolidona, tetrahydrofurano (THF) y ésteres del propio ácido succínico.

A su vez, también tienen destacada importancia los alcoholes derivados de azúcares como manitol, sorbitol, xilitol o eritritol. Estos compuestos pueden ser potenciales combustibles, utilizados para la síntesis de polímeros o como aditivos en la industria farmacéutica. También son utilizados en la industria alimentaria como hidratantes, endulzantes, suavizantes, texturizantes o como alimento para pacientes diabéticos.⁵

Otra molécula plataforma de gran relevancia es el ácido láctico, cuyas propiedades y compuestos derivados se explican en el Apartado 1.3.

1.3. El ácido láctico como “molécula plataforma”

Esta molécula fue descubierta en 1780 por el químico sueco Scheele en leche ácida.^{6,7} A pesar de su descubrimiento tan tardío, se encuentra en todos los organismos vivos y se estima que ha estado presente desde el inicio de la vida celular.

Tanto el ácido láctico como sus derivados tienen un campo de aplicación muy amplio debido a sus singulares propiedades físicas y biológicas. En particular, el ácido láctico se emplea en la industria alimentaria, en bebidas, golosinas, salsas, etc. debido a su acidez media; en panadería, como emulsionante y desinfectante; en la industria textil, en el ámbito del curtido de pieles y diversos tratamientos. También, en la industria farmacéutica y cosmética, en tratamientos antiacné, como hidratante o en procesos como la diálisis. Sin embargo, la aplicación más importante hoy en día, y más prometedora es, una vez polimerizado, la síntesis de ácido poli-láctico (PLA) para la obtención de bioplásticos. El valor de mercado de este compuesto fue de 2,64 billones de dólares en 2018 y tiene una tasa de crecimiento anual compuesto entre 2019 y 2025 del 18,7%⁸

La Figura 4 muestra una molécula de ácido láctico, en la que se pueden observar los distintos grupos funcionales (ácido carboxílico, hidroxilo).

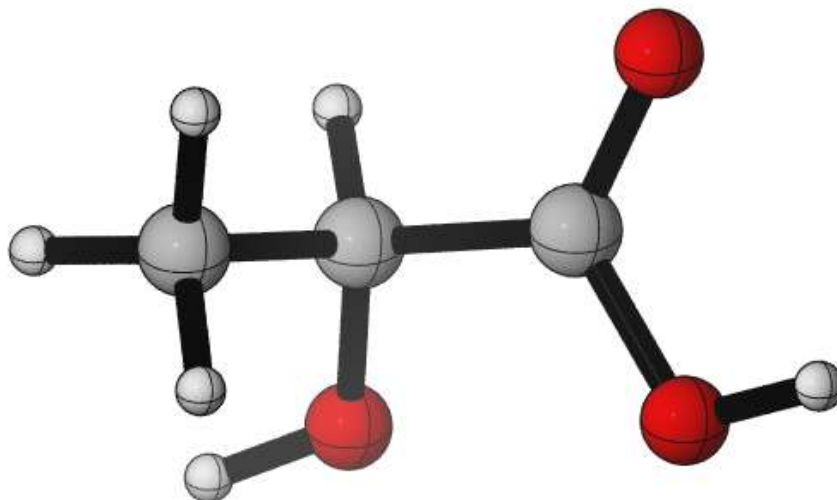


Figura 4. Molécula de ácido láctico.

Como se ha mencionado en el apartado anterior, el ácido láctico (ácido 2-hidroxipropanoico) es una molécula plataforma de gran utilidad, ya que se trata de un compuesto altamente oxidativo con elevada reactividad y baja densidad de energía. Esto hace que no sea un compuesto final adecuado. Sin embargo, es un buen precursor activo para diferentes compuestos químicos, tal como se ilustra en la Figura 5. Las principales reacciones que tienen lugar a partir de ácido láctico son la deshidratación o la esterificación, debido a su química redox. Otras posibilidades pueden ser su oxidación o reducción. Y, por último, una opción menos común es el reformado catalítico donde se forman cetonas (de 5 a 7 átomos de carbono), que son compuestos menos oxidados y con mayor poder calorífico, por lo que son apropiados para combustibles.⁹

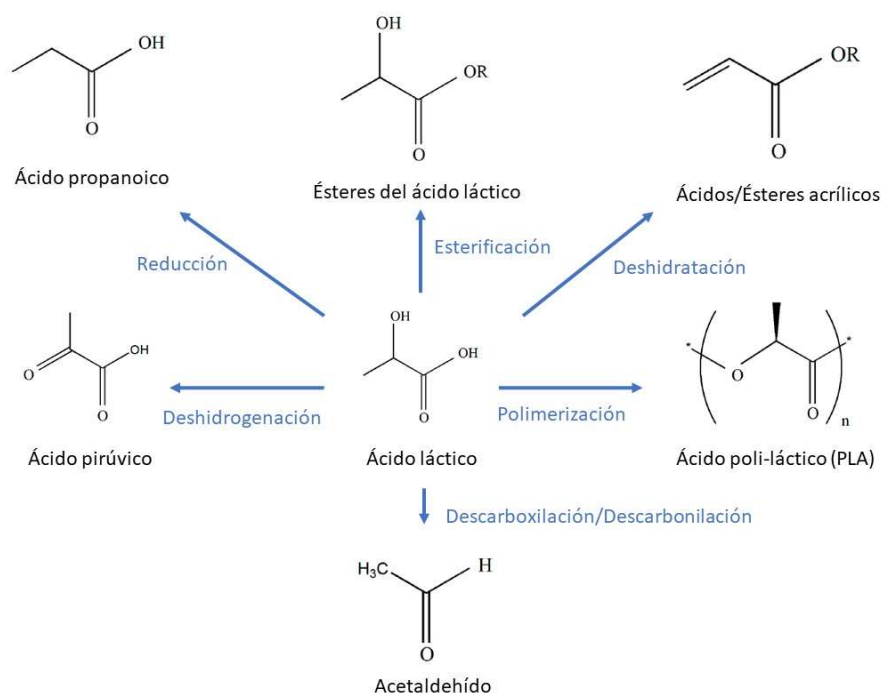


Figura 5. Esquema de la principal química del ácido láctico como "molécula plataforma".

El ácido poli-láctico adquiere gran importancia dado que es un buen sustituyente de plásticos como el polietileno (PET) en la industria del packaging, siendo ésta la que más plástico utiliza globalmente. El principal fabricante de este bioplástico es la empresa americana NatureWorks LLC, que en 2011 produjo 187000 toneladas de PLA¹⁰ y el crecimiento anual de la producción de este termoplástico crece a razón de entre el 10% y el 24%.^{11,12}

El acetaldehído también es utilizado como producto de partida para la síntesis de materiales poliméricos como el PET, en la fabricación de pinturas y lacas o en la industria del papel y del caucho. Se encuentra presente en la industria alimentaria como conservante de carnes o en bebidas, pero su uso ha disminuido en los últimos años, dado que es considerado un potencial carcinogénico del grupo 1. A pesar de la reducción de su uso en este sector, se espera un crecimiento anual del volumen de mercado del 6,37% entre 2020 y 2027.¹³

Otro derivado del ácido láctico de gran relevancia es el ácido pirúvico, clave en el organismo humano en la transformación de la glucosa en energía. Principalmente es utilizado en la industria farmacéutica como sedante, antioxidante o en tratamientos para la hipertensión. También forma parte de suplementos alimenticios y alimentos dietéticos, ya que acelera el metabolismo. Asimismo, en la industria cosmética se usa como

exfoliante, en la industria química como estabilizante y en la industria agroquímica como precursor de pesticidas. La tasa de crecimiento anual compuesto se estima del 2,4% entre 2021 y 2026.¹⁴

Otros derivados del ácido láctico a destacar son el ácido propanoico, empleado en la industria alimentaria como conservante, ya que impide el crecimiento de moho y bacterias; y los ésteres del ácido láctico, cuyo empleo es similar al propio ácido láctico. Del mismo modo, los ácidos y ésteres acrílicos están presentes en la fabricación de pinturas, adhesivos, tintes o empleados en la síntesis de polímeros.

1.4. Problemática de la producción de ácido láctico

El ácido láctico se puede producir por dos vías: la biotecnológica, a través de la fermentación microbiana, y la química, utilizando catalizadores. El volumen de producción anual de este compuesto ronda las 370000 toneladas, con un valor en el mercado de 2,64 billones de dólares y una tasa de crecimiento anual compuesto del 18,7% entre 2019 y 2025.⁸

Hoy en día, la mayor parte de la producción industrial de este compuesto se lleva a cabo por fermentación de carbohidratos con la ayuda del microorganismo adecuado.¹⁵

Sin embargo, este proceso presenta diversos inconvenientes, ya que se realiza de forma discontinua y necesita largos periodos de reacción. Además, produce grandes cantidades de residuos, así como una baja concentración de productos en disolución acuosa, lo que requiere un alto consumo de energía para su purificación. Además, estos procesos son muy sensibles a parámetros tales como la temperatura y el pH.¹⁶

Por este motivo, y aunque el 90 % del ácido láctico comercial se sigue produciendo por la vía fermentativa, se están estudiando rutas químicas alternativas para reducir los impactos ambientales. Entre estas alternativas, se encuentra la catálisis homogénea, ya implementada como proceso industrial en la síntesis de ácido láctico a partir de acetaldehído (recurso petroquímico). Sin embargo, la catálisis heterogénea es otra posibilidad muy prometedora para solventar los problemas que presenta el empleo de catalizadores homogéneos, ya que estos suelen ser tóxicos y/o corrosivos y su recuperación es difícil y costosa.

1.5. Obtención de ácido láctico mediante zeolitas como catalizadores heterogéneos

La catálisis heterogénea es una alternativa en investigación para solventar los inconvenientes derivados de la fermentación y de la catálisis homogénea. En este sentido, diferentes sólidos porosos se han estudiado como catalizadores en la conversión de azúcares. En concreto, los primeros estudios en este ámbito se llevaron a cabo en 1992 cuando Kelly, de la compañía BP Chemicals Ltd., patentó resinas de intercambio iónico como catalizadores para la conversión de triosas en ácido láctico.

Sin embargo, no fue hasta 2007 cuando se usaron los primeros sólidos porosos como catalizadores en este tipo de reacciones cuando Janssen y colaboradores,¹⁷ publicaron el uso de *zeolita Y* comercial (estructura tipo FAU) para la conversión de azúcares en lactatos de alquilo. A partir de ahí, el uso de zeolitas en la conversión de azúcares ha atraído un importante interés en la última década y son numerosos los estudios encontrados al respecto.

Las zeolitas son aluminosilicatos cristalinos hidratados con estructuras tridimensionales porosas constituidas por tetraedros $[\text{SiO}_4]^{4-}$ y $[\text{AlO}_4]^{5-}$ enlazados a través de los átomos de oxígeno que los forman, dando lugar a cavidades intracristalinas regulares y canales de dimensiones moleculares. El contenido de Si y Al varía entre las diferentes topologías, encontrando en los dos extremos zeolitas que sólo contienen Si como la *silicalita-1*, y zeolitas con alto contenido de Al, como es el caso de la *zeolita A*.

En la Figura 6 se muestra la clasificación de los diferentes materiales porosos que se pueden utilizar como catalizadores heterogéneos. En este trabajo se va a utilizar un catalizador del tipo MCM-41 para la síntesis heterogénea de ácido láctico.

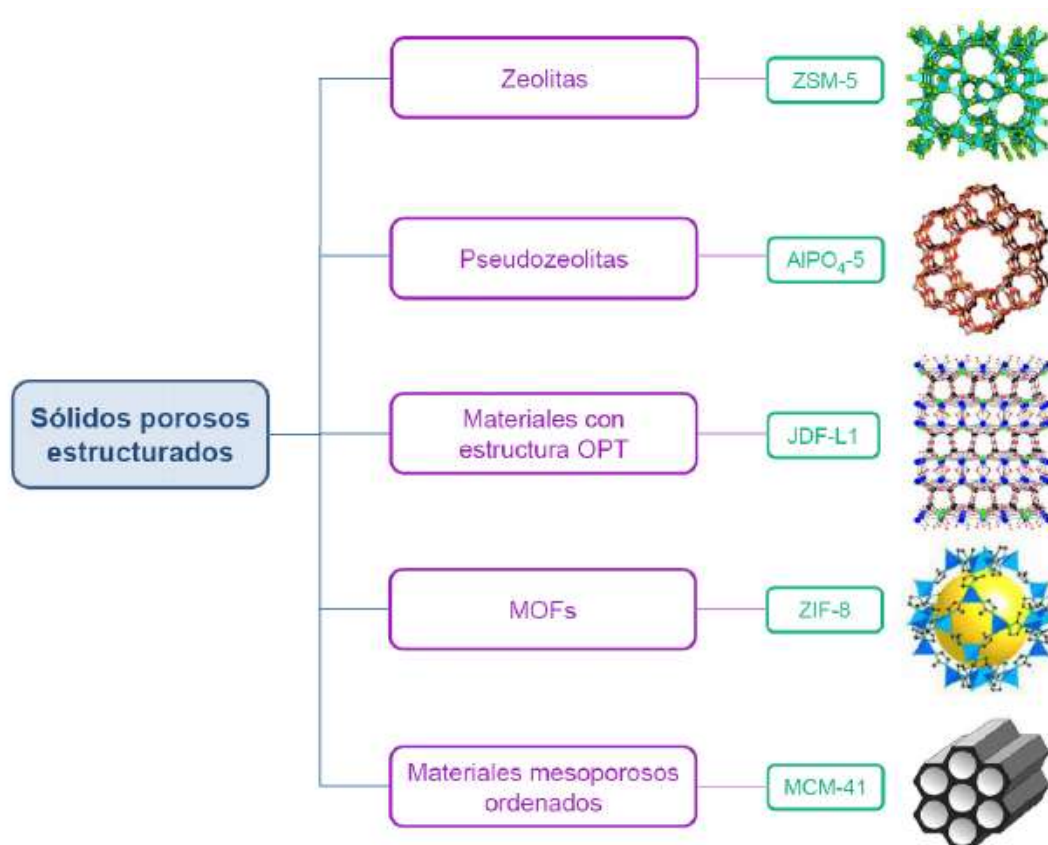


Figura 6. Clasificación de los materiales porosos estructurados. (Imagen obtenida de www.lenmtech.pl).

1.6. Obtención de ácido láctico con Sn-MCM-41 como catalizador

Aunque existe una gran variedad de materiales mesoporosos, destacan los basados en sílice por su estrecha distribución de tamaño y regularidad en la forma de los poros, así como por su ordenamiento. Estos materiales son aptos para usarse en diferentes aplicaciones, tales como catálisis, adsorción y separación de gases.¹⁸

La familia denominada M41S es la más importante dentro de los materiales mesoporosos ordenados y la estructura de esta clase de materiales presenta un sistema de poros uniforme. La familia M41S está formada por diferentes estructuras y las más importantes se muestran en la Figura 7. Dependiendo de las condiciones de síntesis (temperatura, concentración de surfactante), la fase del cristal líquido puede tener una estructura u otra. El material con un sistema de poros unidimensional con canales hexagonales se denomina MCM-41 (Mobyl Catalytic Material Number 41).

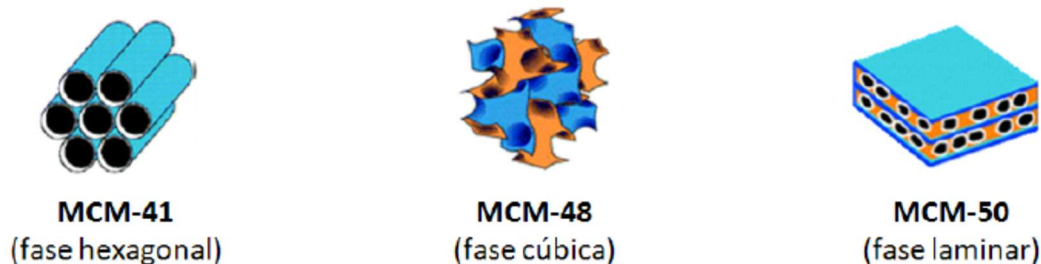


Figura 7. Estructuras principales de la familia M41S: MCM-41, MCM-48 y MCM-50. (Imagen obtenida de www.sigmaaldrich.com).

Una de las limitaciones del MCM-41 es que su estructura es neutra, lo que restringe su uso en determinadas aplicaciones. Además, posee una estructura más flexible que las zeolitas microporosas, lo que permite la incorporación de metales en la estructura del material MCM-41 sin el colapso de la misma, siempre que las condiciones de síntesis estén perfectamente controladas. Por lo tanto, los materiales mesoporosos ordenados de tipo MCM-41 tienen una química apta para la incorporación de diferentes metales. En este trabajo se van a usar sólidos MCM-41 a los que se les ha incorporado Sn para mejorar sus propiedades catalíticas en la síntesis de ácido láctico a partir de glucosa.¹⁹

1.7. Análisis de Ciclo de Vida para la determinación de impactos ambientales

El análisis de ciclo de vida (ACV) se ha impuesto en los últimos años como la herramienta más utilizada por la comunidad científica para la determinación de impactos ambientales de procesos/productos industriales.^{20, 21, 22, 23}

Esta metodología consiste en la compilación de las entradas y salidas de flujos elementales (materias primas, energía, emisiones al aire, agua...) que entran de la ecosfera a la tecnosfera y salen de la tecnosfera para entrar en la ecosfera. En este caso, la tecnosfera supone el ciclo de vida del producto/proceso, tal y como se muestra en la Figura 8. El ciclo de vida del producto/proceso supone la extracción de materias primas de la naturaleza, la transformación de estas, la etapa de fabricación, transporte, uso y fin de vida. El análisis de ciclo de vida supone contabilizar todas las entradas y salidas de flujos en el ciclo de vida y transformar estos flujos en indicadores ambientales.

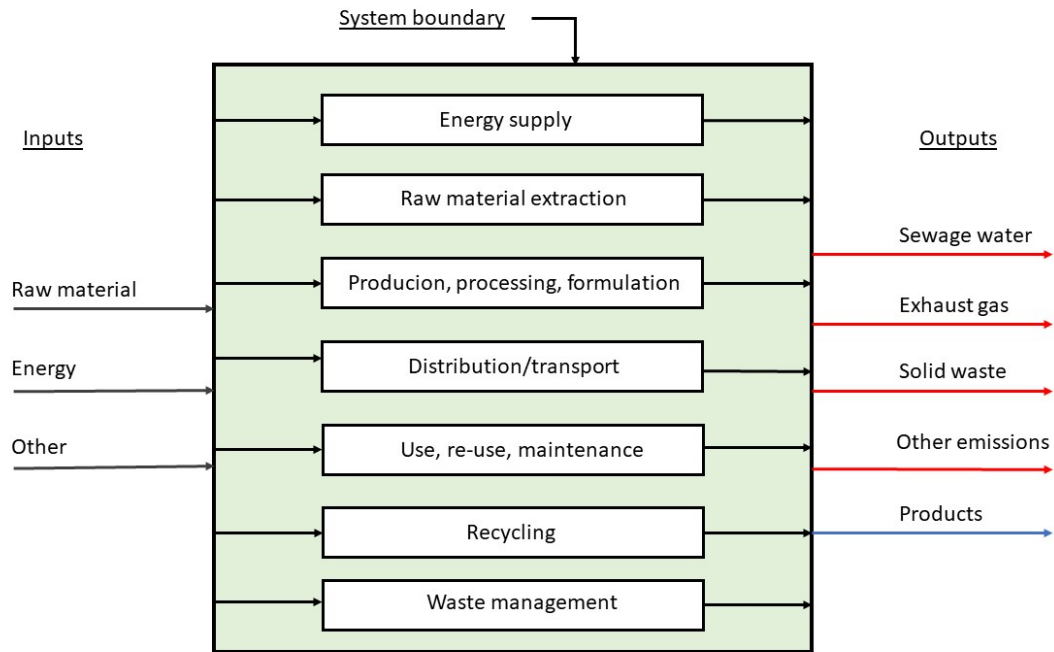


Figura 8. Entradas y salidas de flujos elementales del ciclo de vida de un producto.

En la comunidad científica, es habitual el uso de softwares para la modelización de los ciclos de vida y análisis de impacto ambiental. Las principales ventajas de estos softwares son que permiten una modelización en base a una unidad funcional de cálculo, por ejemplo, la obtención de 1 kg de ácido láctico) y, principalmente, que llevan asociadas unas bases de datos de procesos fundamentales. Estas bases de datos modelizan la producción de varios productos con sus entradas y salidas elementales. Si no existieran estas bases de datos los estudios de ACV serían muy complicados ya que habría que acudir a las distintas empresas a la recolección de datos. Por tanto, para la realización de ACV es necesario tener unas bases de datos amplias y, sobre todo, fiables. Son dos los softwares utilizados por la comunidad científica y que poseen amplias bases de datos: SimaPro y GaBi. En este trabajo se va a utilizar este último.

2. OBJETIVOS DEL PROYECTO

El objetivo de este proyecto es la evaluación del impacto ambiental de la producción de ácido láctico por el método bioquímico y su comparación con la ruta química de catálisis heterogénea usando un catalizador derivado de las zeolitas. Dentro de este objetivo general podemos encontrar los siguientes objetivos más específicos:

2.1. ACV de obtención de ácido láctico por la ruta bioquímica

2.1.1. Análisis de inventario: en la base de datos de GaBi no aparece el proceso de obtención de ácido láctico por la ruta bioquímica, así que habrá que modelizarlo utilizando datos de bibliografía.

2.1.2. Modelización del proceso.

2.1.3. Resultados: se van a mostrar los resultados del impacto de obtener ácido láctico por esta ruta en los indicadores mostrados en la Tabla 6.

2.2. ACV de la obtención de ácido láctico por la ruta química utilizando el catalizador Sn-MCM-41

2.1.1. Análisis de inventario: de nuevo, se van a combinar datos de laboratorio con datos obtenidos de la bibliografía.

2.1.2. Modelización del proceso.

2.1.3. Resultados.

2.3. Comparación de los resultados.

Se van a comparar los valores de los indicadores de la Tabla 6 de las dos rutas propuestas para la obtención de ácido láctico y se va a determinar cuál de ellas posee menor impacto medioambiental.

3. ANÁLISIS DE CICLO DE VIDA (ACV)

Tal y como se ha comentado en el Apartado 1.7, el Análisis de Ciclo de Vida (ACV) es una herramienta de gestión medioambiental cuya finalidad es analizar de forma objetiva, metódica, sistemática y científica, el impacto sobre el medio ambiente (y sus posibles efectos en la salud humana) originado por un proceso/producto durante su ciclo de vida completo.²⁴ Permite identificar los puntos débiles del producto/proceso y analizar posibles alternativas más respetuosas con el entorno. Esta metodología es la recomendada por la Unión Europea para la evaluación de impactos medioambientales y está rigurosamente estipulada por las siguientes normativas:

- Norma UNE-EN ISO 14040 Gestión Ambiental. Análisis del Ciclo de Vida. Principios y marco de referencia (ISO 14040:2006).
- Norma UNE-EN ISO 14044 Gestión Ambiental. Análisis del Ciclo de Vida. Requisitos y Directrices (ISO 14044:2006).

El Análisis de Ciclo de Vida está formado por cuatro etapas claramente (ver Figura 8) diferenciadas que, para su correcto desarrollo, deben ser tratadas de forma iterativa.

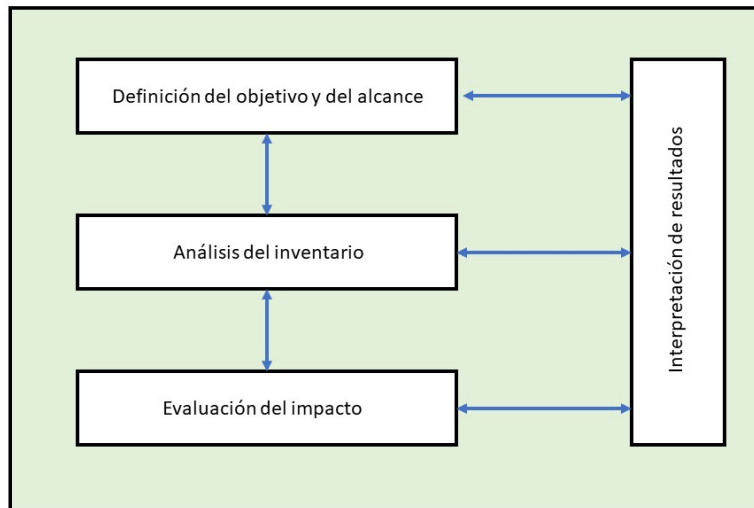


Figura 9. Etapas de desarrollo de un ACV.

3.1. Definición del objetivo y del alcance

En esta etapa se debe exponer los motivos por los que se realiza el estudio, la aplicación prevista y el destinatario del mismo. El alcance consiste en la definición de la amplitud, profundidad y detalle del estudio. Como aspecto clave en esta fase se encuentra la selección de la unidad funcional, que es la unidad de referencia en la cual se expresan,

desde un punto de vista matemático los datos de entrada y salida y los límites del sistema, que marcarán la frontera entre los aspectos que tienen cabida en el estudio y los no trascendentales.

En el caso del presente trabajo, el objetivo del proyecto (ver Apartado 2) es la comparación de la ruta convencional bioquímica de obtención de ácido láctico con la ruta química mediante catalizador Sn-MCM-41. Además, este proyecto está encuadrado en las líneas de investigación desarrolladas por el grupo de investigación “Reactores Químicos y Procesos para la Valorización de Recursos Renovables”, perteneciente al Departamento de Ciencias de la Universidad Pública de Navarra. Por lo tanto, es un proyecto con una finalidad principalmente científica, que busca aportar conocimiento en la búsqueda de nuevas rutas de producción más respetuosas con el medio ambiente. Para realizar la comparación entre ambas rutas, la unidad funcional será 1 kg de ácido láctico. Este estudio se localizará en España, por lo que los datos de emisiones contaminantes en los distintos procesos tendrán que ser lo más similares a los permitidos por nuestra normativa. Como dicta la ISO 14044:2006, en la comparación de dos rutas con la misma unidad funcional, se pueden obviar aquellas partes que aparezcan en ambas, por lo que nos centraremos en la producción directa del ácido láctico y no tendremos en cuenta factores como el transporte.

3.2. Análisis de Inventario de Ciclo de Vida (ICV)

Esta fase consiste en la cuantificación de las entradas y salidas del sistema en estudio, en la que se incluye el uso de recursos (materias primas y energía), las emisiones a la atmósfera, los vertidos al suelo y aguas y la generación de residuos. Básicamente consiste en una tabla o diagrama de flujo que contiene todos los inputs y outputs de un proceso, cuyas cantidades hacen referencia a la unidad funcional. Los datos utilizados en esta fase son vitales para obtener unos resultados rigurosos y relevantes, por lo que las fuentes de información deben ser fiables.²⁴

3.2.1. Análisis de Inventario de la ruta bioquímica

El proceso bioquímico se desarrolla en cuatro etapas principales²⁵:

- Fermentación de la glucosa y neutralización del ácido láctico:

La fermentación de la glucosa se lleva a cabo en un reactor batch a una temperatura de 313 K durante 72 horas. En el reactor se encuentra una mezcla de agua procesada, glucosa, nutrientes, bacterias e hidróxido de calcio. Este último transforma el ácido láctico en lactato de calcio manteniendo el pH entre 5,5 y 6,3, es decir, las condiciones óptimas para la fermentación.

- Hidrólisis del lactato de calcio en medio de ácido sulfúrico:

La mayoría del agua es extraída y se inyecta el ácido sulfúrico, convirtiendo el lactato de calcio en ácido láctico por medio de una hidrólisis a 403 K. Durante esta transformación se genera una gran cantidad de CaSO_4 (yeso), que se deja enfriar y se separa con un filtro, gracias a la escasa solubilidad de este compuesto a temperatura ambiente. Este material de desecho se lleva al vertedero correspondiente, siendo una de las grandes desventajas de esta ruta.

- Esterificación del AL hacia ML y recuperación de ML mediante destilación:

Esta etapa tiene como fin eliminar las impurezas formadas en la fermentación, mediante una destilación con metanol.

Sin embargo, para evitar una destilación en vacío, que requiere mucha energía y supone un gran coste económico, se esterifica en una columna de destilación reactiva el AL a ML, ya que este último es más estable térmicamente, facilitando la destilación. Una vez se ha obtenido el ML, se elimina el metanol, el agua restante y las impurezas en una primera etapa de destilación, seguido de otra etapa para eliminar las sales procedentes de la fermentación y el AL no convertido en ML. La corriente de desecho relacionada con estas operaciones se conduce a una planta de tratamiento de aguas residuales.

- Hidrólisis del ML hacia AL:

Como etapa final, un proceso de hidrólisis a 353 K transforma el metil-lactato en ácido láctico, que se vuelve purificar (99.99 wt.%) mediante destilación con metanol. Los restos de metanol son separados del flujo principal y reciclados para su reutilización.

3. Análisis de Ciclo de Vida

Los datos necesarios para el análisis de inventario de este procedimiento están proporcionados por la bibliografía ²⁵ y en la Figura 10 se muestra el diagrama de flujo correspondiente a la obtención de 1 kg de ácido láctico.

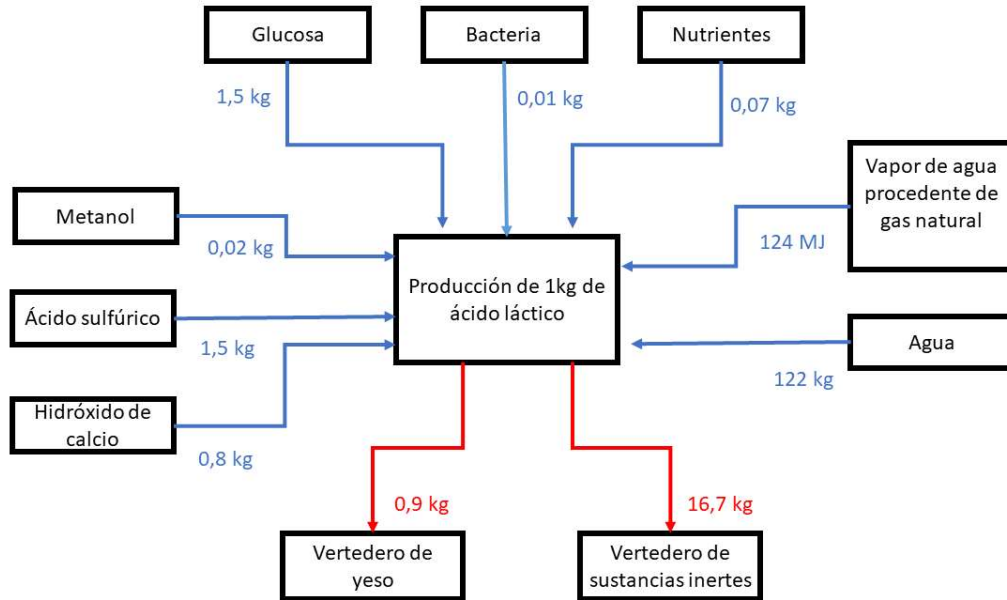


Figura 10. Diagrama de flujo para la obtención de ácido láctico a partir de la fermentación de glucosa.

Para la modelización en el software se ha considerado como nutriente el amoníaco (NH_3), la bacteria utilizada ha sido la *Escherichia coli* (E. coli) con composición $\text{CH}_{1.77}\text{O}_{0.49}\text{N}_{0.24}$ y se ha tomado como capacidad calorífica del vapor de agua a 6 bar 2755 kJ/kg (los datos se introducen en kg, por lo que hay que suplir la cantidad de energía necesaria con una cantidad de vapor de agua).

Sin embargo, muchas de estas sustancias y procesos no están modelizados en el software previamente, por lo que se han tenido que modelizar utilizando bases de datos. En GaBi estaban introducidos el proceso de fabricación de amoníaco (sin recuperación de CO_2), la producción de vapor de agua a partir de gas natural a 6 bar (en España), la producción de hidróxido de calcio ($\text{Ca}(\text{OH})_2$), el agua procesada para su uso industrial, la producción de ácido sulfúrico (en una concentración del 96%) y el tratamiento de las sustancias inertes para la deposición en vertedero.

En primer lugar, se ha realizado el análisis del inventariado (ver Tabla 2) de la producción de la bacteria. Se ha considerado la producción de proteína de seres unicelulares a partir de hexadecano²⁶ y que las bacterias en seco son las proteínas generadas durante la respiración celular. Por tanto, para producir 10,6 moles de materia seca procedente de bacterias, se ha necesitado 1 mol de hexadecano, 12,5 de oxígeno y 2,13 de amoníaco. El

hexadecano no se encuentra en GaBi pero se ha asimilado como queroseno²⁷, ya que su número de carbonos se encuentra entre 13 y 16, y el oxígeno gaseoso sí que se encuentra en GaBi²⁸.

Tabla 2. Inventario de entradas y salidas para la producción de la bacteria *E. coli*.

Inputs	Cantidad
Amoniaco (NH ₃)	36,2 kg
Keroseno	226 kg
Oxígeno (gaseoso)	400 kg
Outputs	
Bacteria	220 kg
Dióxido de carbono (CO ₂)	236 kg

También ha sido necesario modelizar la producción de la glucosa, cuyos datos se han obtenido de la base de datos Ecoinvent²⁹(ver Figura 11). Este proceso es muy importante ya que interviene en ambas rutas, por lo que se ha intentado ser lo más preciso posible y no obviar los flujos de menor cantidad.

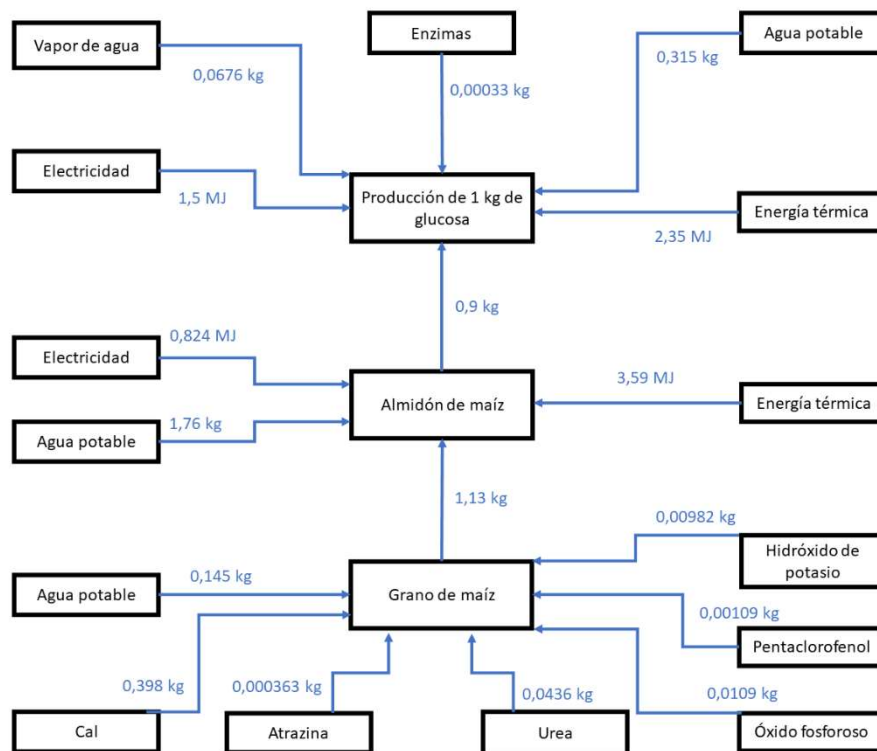


Figura 11. Diagrama de flujo para la obtención de 1 kg de glucosa.

Este proceso se compone de tres fases: la obtención del grano de maíz procedente de las explotaciones agrícolas, la producción del almidón mediante la molienda húmeda del grano y la producción de la glucosa gracias a una hidrólisis enzimática.

De forma similar a la glucosa, se ha modelizado la síntesis del metanol, cuyo análisis de inventario se muestra en la Tabla 3.

Tabla 3. Análisis de inventario para la producción de 1 kg de metanol.

Inputs	Cantidad
Alúmina	0,00024 kg
Electricidad	0,266 MJ
Energía térmica	6,93 MJ
Gas natural	0,652 kg
Agua desalinizada	0,85 kg

3.2.2. Análisis de Inventario de la ruta química

Son dos los procesos principales en la modelización de la ruta química: la reacción catalítica para la obtención de ácido láctico y la síntesis del catalizador Sn-MCM-41. Estos análisis de inventario se han realizado utilizando los datos experimentales proporcionados por la bibliografía.¹⁹

3.2.2.1 Análisis de Inventario de la reacción catalítica

En la reacción llevada a cabo en el laboratorio, para la conversión de glucosa en metil-lactato, se utilizaron 225 mg de glucosa, 8 g de metanol y 160 mg del catalizador disperso en la disolución. Con el catalizador Sn-MCM-41 se obtuvo una conversión de glucosa del 100%, con un rendimiento total de la reacción del 59%. Otros subproductos fueron generados a parte del metil-lactato, siendo el rendimiento de este del 42,7%.

Por lo tanto, a partir de esta información se puede obtener los inputs necesarios para la producción de 1 kg de ácido láctico.

En primer lugar, se calculan los moles de glucosa que intervienen en la reacción, utilizando el peso molecular de 180,1 g/mol.

$$\text{Moles de glucosa} = \frac{\text{Masa}}{\text{Peso molecular}} = \frac{225 \cdot 10^{-3} \text{ g}}{180,1 \text{ g/mol}} = 1,249 \cdot 10^{-3} \text{ moles}$$

Conocido el rendimiento de la reacción para la producción de metil-lactato, se obtienen los moles de este.

$$\text{Moles de M.L} = \eta \cdot \text{Moles de glucosa} = 0,427 \cdot 1,249 \cdot 10^{-3} = 5,33 \cdot 10^{-4} \text{ moles}$$

Considerando que 1 mol de metil-lactato da lugar a 1 mol de ácido láctico, se conocen los moles de ácido láctico producidos.

$$\text{Moles de A.L} = \text{Moles de M.L} = 5,33 \cdot 10^{-4} \text{ moles}$$

Con el peso molecular (90,08 g/mol) del ácido láctico, se obtiene la masa producida en el ensayo experimental.

$$\text{Masa de A.L} = \text{Peso molecular} \cdot \text{Moles} = 90,08 \text{ g/mol} \cdot 5,33 \cdot 10^{-4} \text{ moles} = 0,048 \text{ g}$$

En la Tabla 4, se ilustran las cantidades necesarias para la obtención de 1 kg de ácido láctico siguiendo la ruta química con catalizador Sn-MCM-41, calculados por una relación de proporcionalidad.

Tabla 4. Análisis de inventario de la producción de ácido láctico con catalizador Sn-MCM-41.

Inputs	Cantidad experimental	AICV (4 usos)
Glucosa	225 mg	4,7 kg
Metanol	8 g	166,7 kg
Sn-MCM-41	160 mg	0,825 kg
Ácido láctico	0,048 g	1 kg

El catalizador se reutiliza cuatro veces, dado que el rendimiento resultante es similar en este número de ciclos.

A continuación, se debe calcular la energía térmica necesaria para llevar a cabo la reacción. En el laboratorio, la reacción ha tenido lugar a 160°C (433 K) durante 20 h en un horno rotatorio. Por ello, se calcula la energía necesaria para elevar la temperatura de los reactivos hasta la temperatura de reacción gracias a los calores específicos a presión constante de cada uno de los compuestos; y la energía para mantenerla durante el tiempo de reacción utilizando un factor de aislamiento térmico.

Se comienza con el cálculo de la energía para elevar la temperatura ($E_{\Delta T}$), desde una temperatura ambiente de 25°C. Considerando unos calores específicos a presión constante de 3,3 kJ/kg K para el metanol, 218,8 J/mol K para la glucosa y 0,75 J/g K para el Sn-MCM-41:

$$E_{\Delta T} = (Cp_{met} \cdot Masa_{met} + Cp_{glu} \cdot Moles_{glu} + Cp_{cat} \cdot Masa_{cat}) \cdot (\Delta T)$$

De lo que se obtiene:

$$E_{\Delta T} = 7,49 \cdot 10^7 \text{ J} = 74,9 \text{ MJ}$$

Como se ha mencionado, la reacción dura 20 h y se considera un factor de aislamiento térmico de 0,1 por lo que la energía necesaria para mantener la temperatura (E_T) es:

$$E_T = R \cdot E_{\Delta T} \cdot t = 0,1 \cdot 7,49 \cdot 10^7 \text{ J} \cdot 20 \text{ h} = 1,5 \cdot 10^8 \text{ J} = 150 \text{ MJ}$$

Sumando ambos se obtiene la energía necesaria total:

$$E = 74,9 \text{ MJ} + 150 \text{ MJ} = 224,9 \text{ MJ}$$

En la Figura 12 se muestra el diagrama de flujo correspondiente a la producción de 1 kg de ácido láctico utilizando esta ruta.

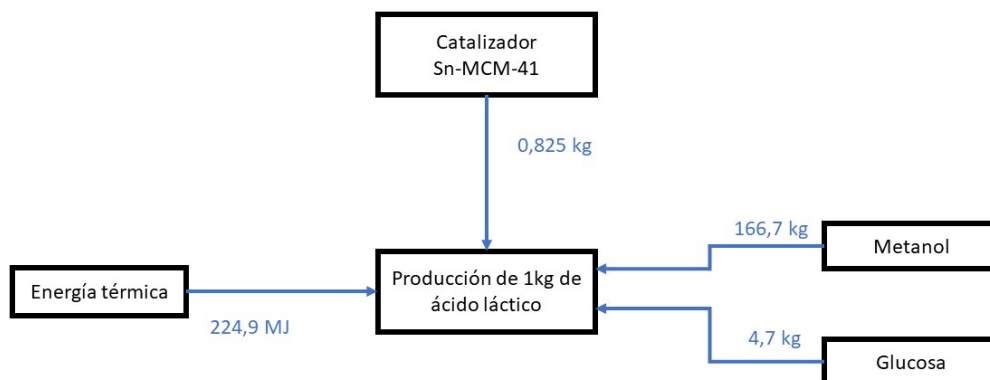


Figura 12. Diagrama de flujo de la reacción catalítica de obtención de ácido láctico.

3.2.2.1 Análisis de Inventario de la producción del catalizador

Una vez conocido que se necesitan 0,825 kg de catalizador Sn-MCM-41 para obtener 1 kg de ácido láctico, se calculan los inputs necesarios para la fabricación de este. Al igual que en el cálculo anterior, los datos experimentales de laboratorio se deben adaptar a nuestro estudio. En la tabla se exponen los datos de la reacción experimental y los datos para la producción de 0,825 kg de catalizador.

Tabla 5. Análisis de inventario para la obtención del catalizador.

Inputs	Cantidad experimental	AICV
H ₂ O	180 ml	45,15 kg
Bromuro de hexadeciltrimetilamonio (CTABr)	4,066 g	1,019 kg
Hidróxido de sodio (NaOH)	1,7265 g	0,433 kg
Tetraetilortosilicato (TEOS)	13,67 g	3,428 kg
Dicloruro de estaño (SnCl ₂)	0,1987 g	0,049 kg
Sn-MCM-41	3,289 g	0,825 kg

La metodología para el cálculo de la energía necesaria para llevar a cabo la reacción de cristalización se realiza de forma similar a la de la reacción catalítica. En este caso, tiempo de es 8 horas y la temperatura es de 80°C.

Para el cálculo de la energía necesaria para aumentar la temperatura ($E_{\Delta T}$), se consideran los siguientes calores específicos a presión constante: 59,52 K/mol K para el NaOH, 4,18 J/g K para el H₂O, 364 J/mol K para el TEOS y 2,09 J/g K para el CTABr.

$$E_{\Delta T} = (Cp_{NaOH} \cdot Moles_{NaOH} + Cp_{H_2O} \cdot Masa_{H_2O} + Cp_{TEOS} \cdot Moles_{TEOS} + Cp_{CTABr} \cdot Masa_{CTABr}) \cdot (\Delta T)$$

De lo que se obtiene:

$$E_{\Delta T} = 10,8 \text{ MJ}$$

De forma similar, con un tiempo de reacción de 8 h y un factor de aislamiento térmico de 0,1 se calcula la energía necesaria para mantener la temperatura (E_T)

$$E_T = R \cdot E_{\Delta T} \cdot t = 0,1 \cdot 10,8 \cdot 10^6 \text{ J} \cdot 8 \text{ h} = 1,5 \cdot 10^8 \text{ J} = 8,67 \text{ MJ}$$

Y finalmente se obtiene la energía total:

$$E = 10,8 \text{ MJ} + 8,67 \text{ MJ} = 19,47 \text{ MJ}$$

Una vez se han obtenido los análisis de inventario necesarios, se procede a la modelización en GaBi. La mayoría de procesos no están en el programa por lo que se han modelizado a partir de la base de datos ECOINVENT²⁹, al igual que en la ruta bioquímica. En esta ruta, para ahorrar metanol, se ha introducido un proceso de destilación, en el cual se consiguen recuperar 158 kg de los 166,7 kg que se necesitan. Por lo tanto, 8,7 kg del metanol es virgen y el resto procede de la recuperación.

La energía necesaria (E_{met}) para este proceso de destilación se calcula a partir del calor específico a presión constante del metanol ($\overline{C_P}$) y el calor latente de vaporización (h_{fg}) a presión ambiente de 1 bar. Para el calor específico a presión constante se toma un valor medio de entre las temperaturas de 25°C y 64,5°C de 2,609 kJ/kg K, que es la franja en la que se realiza la destilación.

$$E_{met} = (\overline{C_P} \cdot Masa_{met}) \cdot (\Delta T) + h_{fg} \cdot Masa_{met} = 1,2 \text{ MJ}$$

El diagrama de flujo para la fabricación de 0,825 kg de catalizador se muestra en la Figura 13.

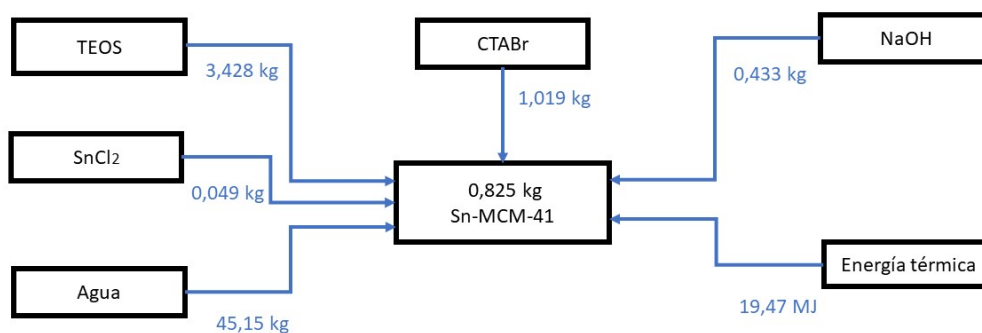


Figura 13. Diagrama de flujo para la obtención de 0,825 kg de catalizador Sn-MCM-41.

3.3. Evaluación del Impacto de Ciclo de Vida (EICV)

Consiste en la relación del Análisis de Inventario de Ciclo de Vida con los impactos ambientales que se producen, con el propósito de valorar la importancia de estos. Para ello, los distintos inputs y outputs del Análisis de Inventario son clasificados en diferentes categorías según el tipo de impacto que generan (p. ej. cambio climático o ecotoxicidad) y transformados a una única unidad de referencia (p. ej. en el caso del cambio climático kg. de CO₂ equivalente).³⁰

En nuestro caso, el software que vamos a utilizar GaBi, realiza esta fase automáticamente, por lo que no es necesario tener en cuenta las diferentes unidades de un tipo de impacto y su posterior transformación en la unidad de referencia.

Los indicadores ambientales que se van a usar en este trabajo son los recomendados por la Unión Europea y que se muestran en la Tabla 6.

3. Análisis de Ciclo de Vida

Tabla 6. Indicadores medioambientales recomendados por el ILCD

(International Reference Lyfe Cycle Data System).³⁰

Nivel de conf.	Siglas	Ud. De ref.	Indicador
I	GWP	kg CO ₂ eq.	Global Warming Potential
I	ODP	kg CFC-11 eq.	Ozone depletion
I	RI	Deaths	Respiratory inorganics
II	IR	kBq U235 eq.	Ionising radiation - human health
II	POF	kg NMVOC eq.	Photochemical ozone formation - human health
II	AC	Mole of H ⁺ eq	Acidification terrestrial and freshwater
II	EUT	Mole of N eq.	Eutrophication terrestrial
II	EUF	kg P eq.	Eutrophication freshwater
II	EUM	kg N eq.	Eutrophication marine
II/III	HTC	CTUh	Cancer human health effects
II/III	HTNC	CTUh	Non-cancer human health effects
II/III	ECFW	CTUe	Ecotoxicity freshwater
III	LU	Pt	Land Use
III	RDM	kg Sb eq.	Resource use, mineral and metals
III	WU	m ³ world equiv.	Water scarcity
III	RU	MJ	Resource use, energy carriers

Tal y como muestra la tabla, los indicadores llevan asignado un nivel de confianza, que refleja fiabilidad que aporta el indicador, y una unidad de referencia, que es aquella unidad que más se asocia con el tipo de impacto.

La confianza aportada a cada indicador viene dada por la facilidad de establecer relaciones entre la emisión de contaminantes de la categoría y los impactos que estos generan.

3.3.1. Indicadores de nivel I

Son aquellos que más confianza poseen y, por lo tanto, los más importantes a la hora de sacar conclusiones en un ACV.

El primero de ellos es el Global Warming Potential o potencial de cambio climático, que engloba aquellas emisiones que pueden causar efecto invernadero como el CO₂, el metano (CH₄), el vapor de agua (H₂O), el óxido nitroso (N₂O) o el ozono (O₃). Su unidad de referencia es el kg de CO₂ eq.

Posteriormente nos encontramos el Ozone Depletion Potential o potencial de agotamiento de la capa de ozono. En este indicador se incluyen todas las emisiones que contienen cloro o bromo y debilitan el espesor de dicha capa. La ud. de referencia es el kg CFC-11 eq. (Clorofluorocarbonos), que son gases derivados de los hidrocarburos saturados que

contienen flúor y cloro y que, al ser emitidos a la atmósfera, se disocian por la acción de los rayos UV y causan daño medioambiental.

El último indicador de este nivel es el Respiratory Inorganics o sustancias inorgánicas respirables. Se refiere a las emisiones de partículas que quedan en suspensión en el ambiente y su respiración puede causar daños en los seres vivos. Pueden ser partículas líquidas o en forma de polvo y se clasifican según su diámetro (menores que 2,5 μm , entre 2,5 μm y 10 μm , mayores que 10 μm). La unidad de referencia son las muertes anuales estimadas que causa la inhalación de este tipo de partículas.

3.3.2. Indicadores de nivel II

Su nivel de confianza es menor y su relevancia en los resultados finales también.

El primero de ellos es el Ionising Radiation o radiación ionizante. Hace referencia al tipo de radiación muy energética y capaz de arrancar electrones fuertemente aferrados a la órbita de un átomo, formando iones. Esta radiación puede ocurrir en forma de ondas o de partículas y puede causar enfermedades muy severas como el cáncer. La unidad de referencia es el kBq U235 eq. El Uranio 235 es el único isótopo presente en la naturaleza capaz de producir una fisión nuclear en cadena, por lo que se toma su actividad como referencia en Becquerels (unidad del SI para medir la actividad radioactiva de una sustancia).

El siguiente es el Photochemical Ozone Formation, que engloba aquellas sustancias cuya emisión produce ozono en la atmósfera, como los óxidos de nitrógeno NO_x y compuestos volátiles orgánicos VOC, que tienen efectos muy dañinos sobre la vegetación (especialmente en concentraciones elevadas, creando un fenómeno conocido como episodio de ozono). Su unidad de referencia es el kg de NMVOC eq. (Non-Methane Volatile Organic Compounds).

En esta categoría también se encuentra el Acidification Terrestrial and Freshwater, en el que se ubican las emisiones que acidifican el agua dulce y el terreno. La ud. de referencia es el Mol de H^+ eq., ya que es el ion de hidrógeno el que altera el pH del terreno y el agua.

Los tres siguientes indicadores son similares, difiriendo en los ecosistemas en los que actúan. Son los indicadores de Eutrophication Terrestrial, Eutrophication Freshwater y Eutrophication Freshwater. Hacen referencia al fenómeno de eutrofización, que consiste en el agotamiento del oxígeno de un volumen de agua debido al enriquecimiento de las aguas con nutrientes. Este exceso de nutrientes favorece la aparición de algas que

consumen gran cantidad de oxígeno del agua, por lo que la calidad de esta disminuye y otros organismos también se ven afectados. Las unidades de referencia son el Mol de N eq. en el caso de la eutrofización terrestre, el kg de P eq. en el caso de la eutrofización de agua dulce y el kg de N eq. en la eutrofización marina.

3.3.3. Indicadores de nivel II/III

En esta categoría nos encontramos aquellos que están especialmente relacionados con la salud humana. Son el Cancer Human Health Effects, el Non-Cancer Human Health Effects y Ecotoxicity Freshwater. El primero de ellos se refiere a aquellas sustancias que están relacionadas con la aparición de cáncer y el segundo a aquellas cuyas enfermedades relacionadas son de otra índole. El último engloba las emisiones que aumentan la toxicidad del agua y, por tanto, dañan la salud de los seres vivos. Las unidades de referencia son CTUh (Comparative Toxic Unit for human) en el caso de los dos primeros y CTUe (Comparative Toxic Unit ecotoxicity) para la ecotoxicidad del agua dulce.

3.3.4. Indicadores de nivel III

Adquieren menor importancia en el estudio debido a su baja confianza. En esta categoría nos encontramos indicadores cuyos impactos están relacionados con el agotamiento de las reservas naturales (Resource Use – Minerals and metals, Resource Use – Energy Carriers) y el uso del planeta (Water Scarcity).

3.4. Interpretación de los resultados

Es la etapa final de todo el Análisis de Ciclo de Vida y es de vital importancia a la hora de obtener unos resultados trascendentes y fiables. La interpretación de los resultados es un proceso que en muchas ocasiones puede ser iterativo, dado que permite analizar y distinguir errores que se hayan podido cometer previamente.

Además, los datos obtenidos deben ser tratados coherentemente con la naturaleza de las fuentes de datos, el objetivo y el alcance prefijado en las etapas iniciales.

3.4.1. Comparación entre ambas rutas

Para obtener una visión más generalizada y poder obtener una conclusión más clara se ha procedido a realizar un diagrama de barras (ver Figura 16), en el que se compara el impacto de cada una de las rutas en cada indicador. Se han suprimido los indicadores RDM y LU dado que “rompían” la escala. Cada indicador posee unas unidades diferentes cuyos valores de impacto no son comparables, por lo que existe una serie de factores correctores de escala que permiten ajustar los impactos y que reflejan una visión más real. En la Tabla 7 se exponen los factores de escala y los valores de impacto ajustados.

3. Análisis de Ciclo de Vida

Tabla 7. Factores de escala para la evaluación de los impactos recomendados por el ILCD.

Impacto	Ud.	Ruta bioquímica	MCM-41+Glucosa	Factor de escala	Ruta bioquímica	MCM-41+Glucosa
GWP	kg CO ₂ eq.	15,45	59,67	GWP (10 ⁻¹)	1,54	5,97
ODP	kg CFC-11 eq.	0,00	0,00	ODP (10 ¹⁴)	1,28	25,97
RI	Disease incidences	0,00	0,00	RI (10 ⁷)	3,62	18,37
IR	kBq U235 eq.	0,16	0,92	IR (10 ¹)	1,59	9,19
POF	kBq U235 eq.	0,01	0,07	POF (10 ²)	1,47	7,13
AC	Mole of H ⁺ eq.	0,05	0,14	AC (10 ²)	4,54	14,00
EUT	Mole of N eq.	0,15	0,54	EUT (10 ¹)	1,48	5,35
EUF	kg P eq.	0,00	0,00	EUF (10 ⁵)	3,17	19,95
EUM	kg N eq.	0,01	0,05	EUM (10 ²)	1,30	4,72
HTC	CTUh	0,00	0,00	HTC (10 ⁹)	2,19	11,34
HTNC	CTUh	0,00	0,00	HTNC (10 ⁷)	0,95	5,01
ECFW	CTUe	74,89	327,10	ECFW (10 ⁻¹)	7,49	32,71
LU	Pt	3,06	261,35	LU	3,06	261,35
WU	m ³ world equiv.	9,69	13,49	WU	9,69	13,49
RU	MJ	236,55	1206,33	RU (10 ⁻²)	2,37	12,06

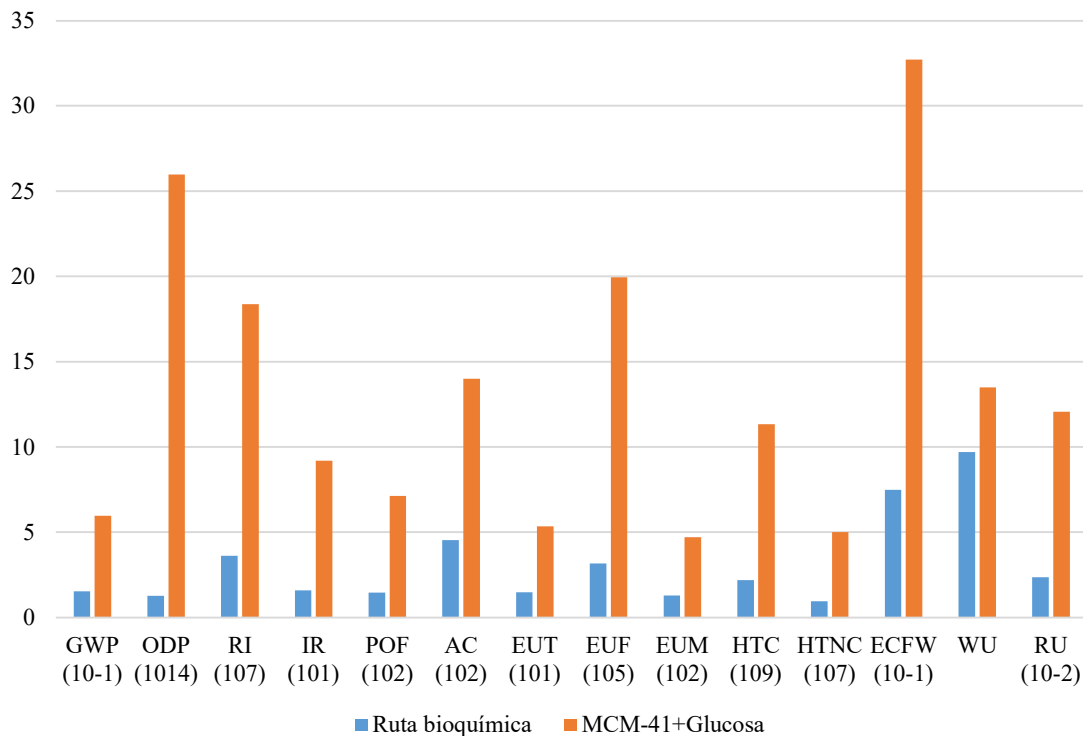


Figura 14. Comparación de los valores absolutos de impacto entre las rutas bioquímica y química mediante catalizador Sn-MCM-41 para la producción de ácido láctico.

Esta gráfica muestra la abrumadora desventaja del proceso químico con catalizador Sn-MCM-41 frente al proceso bioquímico convencional. Todos y cada uno de los indicadores

reflejan un mayor impacto de la ruta química con unas diferencias muy acentuadas, especialmente los indicadores ODP, RI, AC, EUF, HTC, ECFW y RU.

3.4.2. Resultados de la ruta bioquímica

GaBi proporciona los resultados en forma de tabla de valores, distinguiendo los impactos de cada uno de los procesos. Al obtener estos resultados, se ha generado una gráfica (ver Figura 15) que muestra el porcentaje de influencia de cada uno de los procesos en cada indicador. La categoría “Others” se compone por los procesos de síntesis de la bacteria, síntesis del metanol, producción del hidróxido de calcio, tratamiento del yeso, producción del amoníaco, tratamiento de agua procesada y obtención final de ácido láctico.

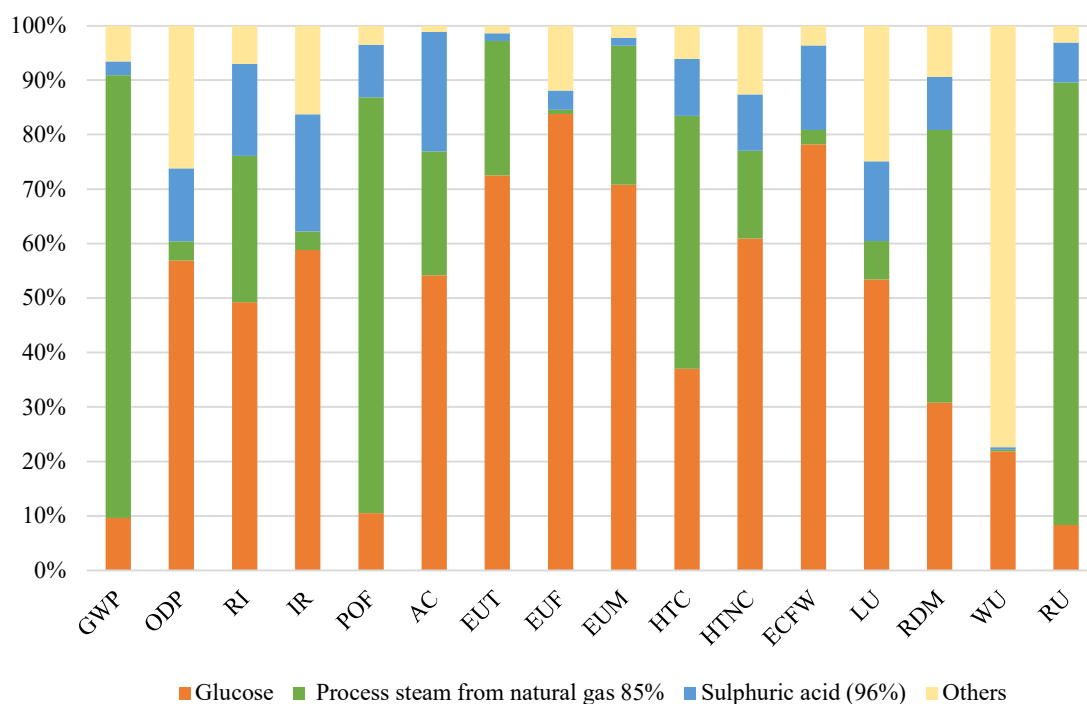


Figura 15. Porcentajes de influencia de cada uno de los procesos para cada indicador en la ruta bioquímica.

En aspectos generales, resulta obvio que los procesos más impactantes son los de producción de glucosa y la producción de vapor de agua.

De acuerdo con el indicador GWP, estos procesos suman más del 90% del total del impacto, correspondiendo el 81,27% al vapor de agua y el 9,65% a la glucosa. Concuera con las posibles suposiciones que se pueden esperar, dado que el vapor de agua se produce a partir de gas natural, cuyas emisiones de gases de efecto invernadero son muy significativas. El impacto del resto de procesos resulta meramente anecdótico.

Prosiguiendo con el indicador ODP, el proceso de mayor impacto es la producción de la glucosa, suponiendo el 56,9% del total. Realizando un análisis dentro del propio proceso,

se encuentra que la mayoría de este tipo de emisiones son relativas a la energía eléctrica necesaria, con el 86,38% de las emisiones de ODP.

Para finalizar con los indicadores de nivel I, se observa el indicador RI. En este, la mayoría de las emisiones son relativas a los procesos de la glucosa (49,22%) y del vapor de agua (26,87%) pero también cobra importancia la producción de ácido sulfúrico (16,85%).

Comenzando con los indicadores de nivel II, se encuentra el IR. En este indicador, el proceso del vapor de agua no es tan significativo, con el 3,41% del total de emisiones. Sin embargo, la glucosa sigue siendo muy relevante (58,84%) y al igual que en el indicador RI, adquiere importancia la producción de ácido sulfúrico, con el 21,48%.

Relativo al indicador POF, la producción vapor de agua es de nuevo el proceso más impactante con el 76,34%.

Dentro del nivel II de confianza, también se encuentra el indicador AC, que es dominado mayoritariamente por la producción de la glucosa con el 54,15% del impacto, por el vapor de agua con el 22,74% y el ácido sulfúrico con el 21,92%.

En los indicadores relativos a la eutrofización EUT, EUF y EUM, la glucosa es el proceso más impactante en todos, con unos porcentajes de influencia del 72,49% para el EUT, un 83,79% para el EUF y un 70,80% para el EUM. También concuerda con lo esperado, dado que la producción de glucosa se lleva a cabo a partir de almidón de maíz, cuya producción involucra el uso de muchos nutrientes.

En los indicadores de nivel II/III y III, que poseen menor relevancia, la tendencia de dominio del impacto por los procesos de producción de agua, glucosa y ácido sulfúrico es similar, exceptuando el porcentaje de impacto del proceso de producción de ácido láctico en el indicador WU, abarcando el 47,41% del total.

3.4.3. Resultados de la ruta química

Al igual que se ha realizado en la vía de producción bioquímica, se ha elaborado una gráfica con los datos extraídos de GaBi (ver Figura 16).

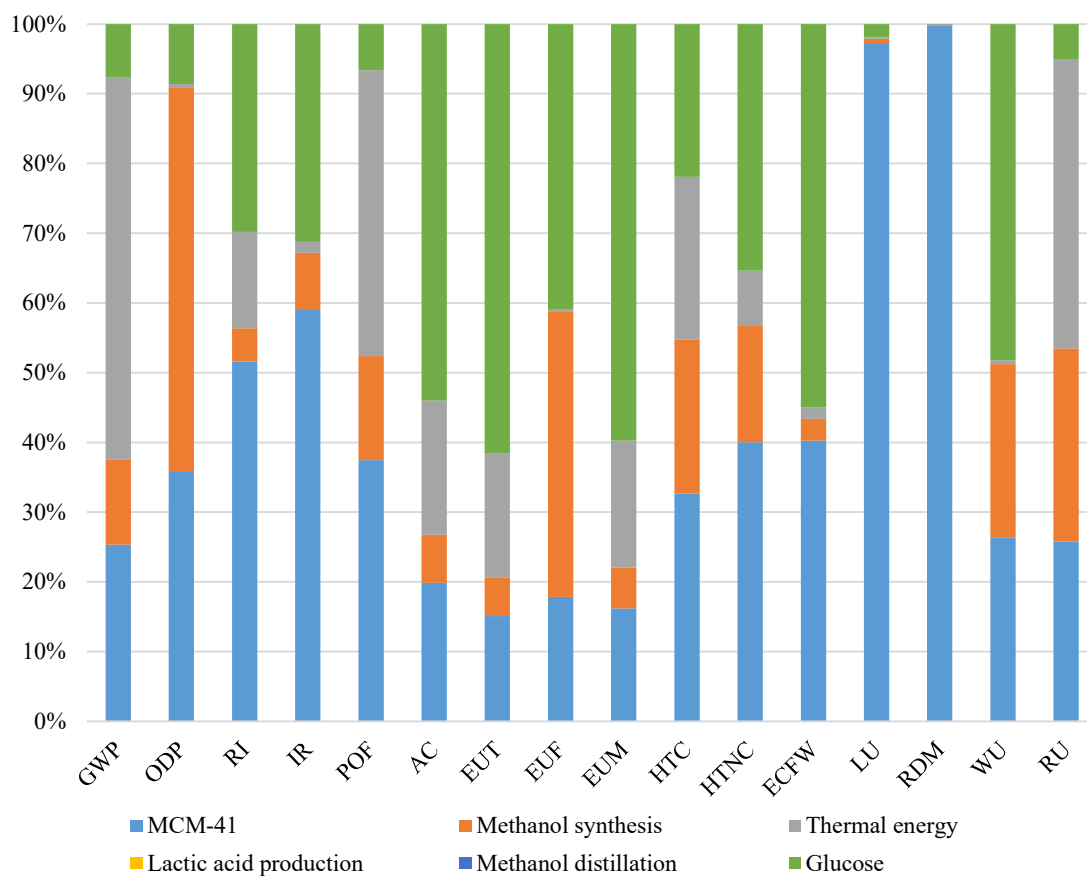


Figura 16. Porcentajes de influencia de cada uno de los procesos para cada indicador en la ruta química con catalizador Sn-MCM-41.

Esta gráfica refleja claramente que la mayoría del impacto proviene de la producción de la glucosa, del MCM-41 y de la síntesis del metanol. Sin embargo, se debe tener en cuenta que se han unificado los procesos de aporte de energía térmica relativos al propio proceso de producción del ácido láctico y a la destilación del metanol. Se puede considerar que el 45,89% del impacto corresponde a la destilación del metanol (ya que necesita 190 MJ por kg de ácido láctico) y el 54,11% al propio proceso de producción de ácido láctico, que necesita 224 MJ.

Comenzando por los indicadores de mayor nivel de confianza, es decir, los de nivel II, nos encontramos el GWP. El mayor porcentaje en este indicador lo posee el proceso correspondiente a la energía térmica con el 54,80%, seguido de la síntesis del catalizador Sn-MCM-41 con el 25,33 % y la síntesis del metanol con el 12,19%.

Al igual que en la anterior ruta, estos datos concuerdan con las posibles expectativas, dado que son procesos de gran requerimiento energético.

Más de la mitad de las emisiones relativas al indicador ODP se atribuyen al proceso de síntesis de metanol 55,04%. También es relevante el impacto generado por la síntesis del catalizador, con un porcentaje de influencia del 35,87 %. Es muy llamativo el gran impacto del metanol en este indicador, especialmente si tenemos en cuenta que solo 8,7 kg de los 166,7 kg necesarios son vírgenes.

Concluyendo con los indicadores de nivel I está el RI. El 51,61% de las emisiones se corresponden al catalizador y el 29,81% a la producción de la glucosa.

En primer indicador de nivel II es el IR, dominado por la síntesis del Sn-MCM-41 con el 58,97% del impacto. La producción de glucosa, al igual que en la mayoría de indicadores tiene relevancia con el 31,25%.

Siguiendo con el indicador POF, el mayor porcentaje de impacto se reparte principalmente entre la energía térmica con el 40,98% y el catalizador con el 37,46%.

En los indicadores relacionados con la acidificación del entorno (AC) y la eutrofización (EUT, EUF y EUM), la glucosa es el proceso más impactante. Como se ha explicado en la ruta bioquímica, la mayoría de este impacto procede de la producción del almidón de maíz.

En el resto de indicadores de nivel II/III y III, la tendencia de reparto equilibrado del impacto continúa entre los procesos de obtención de glucosa, metanol y catalizador. Cabe destacar el gran agotamiento de recursos y uso del terreno por parte del Sn-MCM-41, que es debido a la gran cantidad de metales necesarios para su síntesis (CTABr y SnCl₂).

4. CONCLUSIONES

Los resultados obtenidos en el apartado anterior dictan una conclusión muy clara y deben guiar para una reflexión adecuada, en búsqueda de la reducción de impactos.

- El proceso de obtención de ácido láctico por la ruta bioquímica de fermentación de glucosa es significativamente menos impactante que el proceso para la obtención mediante catalizador Sn-MCM-41 con glucosa.

En primer lugar, la ruta tradicional requiere un menor gasto energético de forma directa que la ruta química. Los análisis de inventario correspondientes muestran una demanda energética de 124 MJ para el proceso bioquímico y de 224,9 MJ para el proceso químico con catalizador.

Asimismo, este no es el único punto débil de esta ruta química, si no que la diferencia se acentúa debido a la síntesis del catalizador. Este elemento, que podemos incluir dentro de los materiales inorgánicos, tiene un proceso de síntesis muy elaborado con el consumo de sustancias químicas complejas (como el TEOS, CTABr) cuya obtención es más dañina para el medio ambiente.

Otro punto a favor de la ruta bioquímica es el menor consumo de glucosa referente a la unidad funcional. Se requieren 4,7 kg de glucosa en la vía química frente a los 1,5 kg necesarios para el proceso bioquímico.

Es similar lo que ocurre con el metanol. La ruta bioquímica demanda 0,02 kg de metanol por kg de ácido láctico, mientras que la ruta química con catalizador necesita 166,7 kg. A pesar de introducir el proceso de destilación de metanol en la ruta química, la diferencia entre ambas es tanta que, aunque solo tengamos en cuenta el metanol virgen (8,7 kg por kg de ácido láctico), sigue sin ser “competitivo” en este aspecto.

Sin embargo, esto deja abierta la puerta a distintas mejoras que se pueden introducir en la ruta química de catálisis heterogénea, con el objetivo de reducir los impactos medioambientales.

- El catalizador Sn-MCM-41 ha sido reutilizado cuatro veces. Los datos bibliográficos indican una posible reutilización de hasta doce veces. Si el rendimiento medio entre todos los usos es lo suficientemente alto, es posible que se reduzca el consumo de catalizador.

- El metanol utilizado ha sido modelizado siguiendo el proceso convencional utilizando gas natural que deriva en monóxido de carbono e hidrógeno como gases de síntesis. El uso de biometanol podría contribuir a la disminución de los impactos ambientales.
- Diversos grupos de investigación investigan sobre los procesos de catálisis para obtención de ácido láctico, por lo que en un futuro se pueden encontrar catalizadores con mayor rendimiento que deriven en menores daños al medio ambiente.

5. BIBLIOGRAFÍA

1. (a) Huber G. W.; Iborra, S.; Corma, A. Synthesis of Transportation Fuels from Biomass: Chemistry, Catalysts, and Engineering. *Chem. Rev.* **2006**, *106*, 4044–4098. (b) Simil, V. *Energy at the Crossroads, Global Perspectives and Uncertainties*; MIT Press: Cambridge, 2003. (c) Navlani-García, M.; Mori, K.; Kuwahara, Y.; Yamashita, H. Recent strategies targeting efficient hydrogen production from chemical hydrogen storage materials over carbon-supported catalysts. *NPG Asia Mater.* **2018**, *101*, 277–292.
2. Cherubini, F. The biorefinery concept: Using biomass instead of oil for producing energy and chemicals. *Energy Convers. Manag.* **2010**, *51*, 1412–1421.
3. Spekreijse, J.; Lammens, T.; Parisi, C.; Ronzon, T.; Vis, M. *Insights into the European market of bio-based chemicals. Analysis based on ten key product categories. EUR 29581 EN*; Publications Office of the European Union: Luxemburgo, 2019.
4. Stichnothe, H.; Bell, G.; Jørgensen, H.; De Bari, I.; van Haveren, J.; Lindorfer, J.; Kepler, J.; de Jong, E. Bio-Based Chemicals: A 2020 Update. *IEA Bioenergy.* **2020**, *42*, 01.
5. Kohli, K.; Prajapati, R.; Sharma, B. J. Bio-Based Chemicals from Renewable Biomass for Integrated Biorefineries. *Energies.* **2019**, *12*, 23.
6. Brin, M. The Synthesis and Metabolism of Lactic Acid Isomers. *Ann. N. Y. Acad. Sci.* **1965**, *119*, 942–956.
7. Brin, M. Lactic acid – some definitions. *Ann. N. Y. Acad. Sci.* **1965**, *119*, 1084–1090.
8. Lactic Acid Market Size, Share & Trend Analysis Report By Raw Material (Corn, Sugarcane), By Application (Industrial, Food & Beverages, Polylactic Acid), By Region, And Segment Forecasts, 2019 – 2025. *Grand View Research* **2019**.
9. Dusselier, M.; Van Wouwe, P.; Dewaele, A.; Makshina, E.; Sels, B. F. Lactic acid as a platform chemical in the biobased economy: The role of chemocatalysis. *Energy Environ. Sci.* **2013**, *6*, 1415–1442.
10. NatureWorks LLC, **2012**, <http://www.natureworkslc.com/>.
11. European Bioplastics, Driving the evolution of plastics. **2012**, <https://www.european-bioplastics.org>
12. Carus, M. Growth in PLA bioplastics: a production capacity of over 800,000 tonnes expected by 2020. *Nova-Institute*, Hürth, **2012**.
13. Global Acetaldehyde Market – Industry Trends and Forecast to 2027. *Data Bridge Market Research* **2020**.
14. Pyruvic Acid Sales Market 2021 Size, Global Trends, Comprehensive Research Study, Development Status, Opportunities, Future Plans with Business Growth at a CAGR of 2.4%, Competitive Landscape and Forecast 2026. *Market Watch.* **2021**.
15. Abdel-Rahman, M. A.; Tashiro, Y.; Sonomoto, K. Lactic acid production from lignocellulose-derived sugars using lactic acid bacteria: Overview and limits. *J. Biotechnol.* **2011**, *156*, 286–301.
16. Lima, S.; Dias, A. S.; Lin, Z.; Brandão, P.; Ferreira, P.; Pillinger, M.; Rocha, J.; Calvino-Casilda, V.; Valente, A. A. Isomerization of d-glucose to d-fructose over metallosilicate solid bases. *Appl. Catal. A Gen.* **2008**, *339*, 21–27.
17. Janssen, K. P. F.; Paul, J. S.; Sels, B. F.; Jacobs, P. A. Glyoxylase biomimics: zeolite catalyzed conversion of trioses. *Studies in Surface Science and Catalysis*; Elsevier. B. V: 2007, vol. 170.
18. Meynen, V.; Cool, P.; Vansant, E. F. Verified syntheses of mesoporous materials. *Micropor. Mesopor. Mater.* **2009**, *125*, 170–223.
19. Murillo, B.; Sánchez, A.; Sebastián, V.; Casado-Coterillo, C.; de la Iglesia, O.; López-Ram-de-Viu, M. P.; Téllez, C.; Coronas, J. Conversion of glucose to lactic acid derivatives with mesoporous Sn-MCM-41 and microporous titanosilicates. *J. Chem. Technol. Biotechnol.* **2014**, *89*, 1344–1350.
20. Navajas, A.; Uriarte, L.; Gandía, L. M. Application of eco-design and life cycle assessment standards for environmental impact reduction of an industrial product. *Sustainability* **2017**, *9*, 1724.

21. Navajas, A.; Bernarte, A.; Arzamendi, G.; Gandía, L. M. Ecodesign of PVC packing tape using life cycle assessment. *Int. J. Life Cycle Assess.* **2014**, *19*, 218–230.
22. Navajas, A.; Mendiara, T.; Goñi, V.; Jiménez, A.; Gandía, L. M.; Abad, A.; García-Labiano, F.; de Diego, L. F. Life cycle assessment of natural gas fuelled power plants based on chemical looping combustion technology. *Energy Convers. Manag.* **2019**, *198*, 111856.
23. Navajas, A.; Mittal, N.; Rangnekar, N.; Zhang, H.; Cornejo, A.; Gandía, L. M.; Tsapatsis, M. Environmental Evaluation of the Improvements for Industrial Scaling of Zeolite Membrane Manufacturing by Life Cycle Assessment. *ACS Sustainable Chem. Eng.* **2018**, *6*, 15773–15780.
24. Haya, E. Apuntes Análisis de Ciclo de Vida, Máster en Ingeniería y Gestión Medioambiental de la EOI, Escuela de Organización Industrial y Negocios, **2016**.
25. Morales, M.; Dapsens, P. Y.; Giovinazzo, I.; Witte, J.; Mondelli, C.; Papadokonstantakis, S.; Hungerbühler, K.; Pérez-Ramírez, J. Environmental and economic assessment of lactic acid production from glycerol using cascade bio-and chemocatalysis. *Energy Environ. Sci.* **2015**, *8*, 558–567.
26. Doran, P. M. *Bioprocess Engineering Principles (2 ed.)*; Elsevier. B. V.: 2012.
27. Thinkstep, Kerosene / Jet A1 at refinery; from crude oil; production mix, at refinery; 480 ppm sulphur. <http://gabi-documentation-2019.gabi-software.com/xml-data/processes/701f8775-bd15-4b91-b3d0-43e7ee04044a.xml>
28. Thinkstep, Oxygen (gaseous); via cryogenic air separation; production mix, at plant; 1.429 kg/m³, 16.0 g/mol. <http://gabi-documentation-2019.gabi-software.com/xml-data/processes/de25dd0e-0072-4e8d-af0d-df6b17c05e1e.xml>
29. Wernet, G., Bauer, C., Steubing, B., Reinhard, J., Moreno-Ruiz, E., Weidema, B. The ecoinvent database version 3 (part I): overview and methodology. *Int. J. L. C. A.* **2016**, *21*(9) 1218–1230.
30. European Commission, Joint Research Centre. Institute for Environment and Sustainability: International Reference Life Cycle Data System (ILCD) Handbook. General guide for Life Cycle Assessment – Provisions and Action Steps. First edition March 2010. EUR 24378 EN. Luxemburgo; Publications Office of the European Union: **2010**.